Количество изомеров.

Безверхний Владимир Дмитриевич.

Украина, e-mail: bezvold@ukr.net

Количество структурных изомеров для молекулы алкана будет всегда меньше 2^(n-1), где n – количество атомов углерода. Точную формулу можно строго вывести, для этого нужна помощь математиков специализирующихся в комбинаторике. Далее рассмотрим, как точно посчитать изомеры.

Для понимания достаточно проанализировать количество изомеров для молекулы пентана (n = 5).

Пентан имеет три структурных изомера. Вот их формулы:

1. $CH_3 – CH_2 – CH_2 – CH_2 – CH_3$
2. $CH_3 – CH(CH_3) – CH_2 – CH_3$
3. $CH_3 – C(CH_3)_2 – CH_3$

Переведем формулы в цифры, для этого будем считать количество атомов углерода. Тогда для вышеуказанных формул получим:

1. 1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 5
2. 1 + 2 + 1 + 1 = 5
3. 1 + 3 + 1 = 5

Такое разложение в комбинаторике называется композиция числа (когда учитывается порядок частей).

“В теории чисел композицией, или разложением натурального числа называется такое его представление в виде суммы натуральных чисел, которое учитывает порядок следования слагаемых.

Слагаемые, входящие в композицию, называют частями, а их количество — длиной композиции.

Разбиение числа, в отличие от композиции, не учитывает порядок следования частей. Следовательно, число разбиений числа никогда не превосходит числа композиций...” [1].

Рассмотрим теперь все композиции числа 5. Перечислим все 16 вариантов (данные из вышеуказанной ссылки).

5 =

4 + 1 =

3 + 2 =

3 + 1 + 1 =

2 + 3 =

2 + 2 + 1 =

2 + 1 + 2 =

2 + 1 + 1 + 1 =

1 + 4 =

1 + 3 + 1 =

1 + 2 + 2 =

1 + 2 + 1 + 1 =

1 + 1 + 3 =

1 + 1 + 2 + 1 =

1 + 1 + 1 + 2 =

1 + 1 + 1 + 1 + 1 =

Далее, обратим внимание, что для подсчета количества изомеров нужно учитывать только те композиции, которые начинаются и заканчиваются единицей, так как молекулы алканов начинаются и заканчиваются группой –СН3, то есть, единицей. Вот эти 4 композиции.

1 + 3 + 1 =

1 + 2 + 1 + 1 =

1 + 1 + 2 + 1 =

1 + 1 + 1 + 1 + 1 =

Теперь учтем, что две композиции эквивалентны, так как отображают один изомер – изопентан.

CH_3 – CH (CH_3) – CH_2 – CH_3

1 + 2 + 1 + 1 = 5

1 + 1 + 2 + 1 = 5

В результате получим три композиции, которые абсолютно верно представляют 3 изомеры пентана (5):

1 + 3 + 1 =

1 + 2 + 1 + 1 =

1 + 1 + 1 + 1 + 1 =

В общем случае, также необходимо учитывать, что длина любой композиции должна быть больше длины боковых радикалов - это следует из номенклатуры алканов. Учет этого условия отбросит много “пустых” вариантов композиции.

Теперь, думаю, алгоритм вывода формулы абсолютно ясен. Более того, очевидно, что количество структурных изомеров всегда будет меньше количества композиций, то есть, меньше числа 2^(n-1), где n – количество атомов углерода в молекуле алкана. В этом можно убедится, если сравнить количество структурных изомеров для данного числа атомов углерода, и количество вариантов композиции.

Необходимо указать, что в общем случае, числа в композиции больше 2, могут отображать различные изомеры, так как сами заместители подвержены изомерии. Объясним на примере радикала пропила, то есть когда число 4 (3 + 1, 1 - основная цепь). Вот все комбинации, если мы в композиции имеем число 4 (пропильный радикал):

$CH_3 – CH_2 – CH_2$-

CH_3 – CH(-) – CH_3

CH_3 - , $CH_3 – CH_2$ -

То есть, мы имеем 3 варианта.

3

3(i)

1 + 2

Рассмотрим бутильный радикал, то есть, когда в композиции стоит число 5 (4 + 1, 1 - основная цепь).

$CH_3 – CH_2 –CH_2 –CH_2$ –

CH_3 – CH(-) – $CH_2 – CH_3$

$CH_3 – CH(CH_3) – CH_2$ -

CH_3 - , $CH_3 –CH_2 –CH_2$ -

CH_3 - , CH_3 – CH(-) – CH_3

$CH_3 – CH_2$ - , $CH_3 – CH_2$ –

То есть, есть 6 вариантов, когда в композиции стоит число 5.

4

4(i)

1 + 2 + 1

1 + 3

1 + 3(i)

2 + 2

По сути, необходимо учитывать структурную изомерию самих радикалов и деление радикалов на две части, когда в композиции стоят числа больше двух ($\lambda > 2$).

$n = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \ldots + \lambda_n$

Поэтому, вывод точной формулы для количества изомеров алканов можно делать исходя из композиции числа (n), но необходимо учитывать при каких числах изомеры эквивалентны (например, при 2), и то, что длина композиции больше длины радикалов (или равна).

Также нужно учитывать количество изомеров в зависимости от радикала (4, 5, и т.п.), и проанализировать как это соотносится с количеством изомеров. В любом случае, это можно проанализировать и учесть.

Но, совершенно очевидно, что количество структурных изомеров алканов – это композиция числа n (n – количество атомов углерода), хотя и с некоторыми условиями. Поэтому, вывод формулы обязан быть успешным.

Отмечу, что алгоритм для компьютера – элементарен, и поэтому можно написать программу, которая будет рассчитывать количество структурных изомеров для молекул алканов.

Компьютер также посчитает и количество стереизомеров, так как формула подсчета хорошо известна: 2^n, где n - количество асимметричных атомов углерода (то есть, атомов углерода с 4 разными заместителями).

Когда такие формулы будут получены, все остальные гомологические ряды выводятся и программируются аналогично.

1. Composition (combinatorics). Wikipedia (ru). https://en.wikipedia.org/wiki/Composition_(combinatorics)